Index

Commentationes et Relationes

Alagona, G., Cimiraglia, R., Scrocco, E., Tomasi, J.: Theoretical Investigations on the Solvation Process. II. The Monohydrated Associates of Some Three-Membered Ring Molecules . . . 103
Anno, T.: On the Evaluation of the Energies of Hybridized Valence States . . . 248
Armstrong, D. R., Jamieson, J., Perkins, P. G.: The Electronic Structure of the Silyl Halides 396
Ballhausen, C. J., s. Güdel, H. U. . . . 331
Bender, C. F., s. McLaughlin, D. R., et al. . . . 352
Bertran, J.: Theoretical Study of the Photodimerization of Pyrimidine Bases . . . 372
Bessis, G., s. Tapia, O. . . . 130
Bingel, W. A.: Note on the Solution of Secular Problems with Two Non-Orthogonal Basis Functions . . . 196
Briggs, P. J., s. Melrose, M. P. . . . 181
Brown, R. D., Burden, F. R., Hart, B. T.: A Comparison of Lobe and Cartesian Gaussian Basis Sets for Molecular Calculations . . . 49
Burden, F. R., s. Brown, R. D., et al. . . . 49
Choplin, F., Kaufmann, G.: Etude LCAO MO CNDO 2 de la structure électronique de composés du titane . . . 54
Chu, S. Y.: SCF Calculations for H_2^+, Li_2^+ and LiH^+ with Atomic Basis Set Enlarged by Bond Function . . . 200
Cignitti, M., Paoloni, L.: The Electronic Structure of Groups of Isomeric Heteroaromatic Systems. IV. Structure and Spectra of Pyridones and Their N-Methyl Derivatives 277
Cimiraglia, R., s. Alagona, G., et al. . . . 103
Companion, A. L.: A Molecular Orbital Study of Bond Energies in Compounds of Sulfur and Fluorine . . . 268
Crasnier, F., s. Robinet, G., et al. . . . 259
Cremaschi, P., Gamba, A., Simonetta, M.: The Influence of Solvation on the Calculated Activation Energy for the Reaction $CH_3F + F^-$ . . . 237
Dacre, P. D., Elder, M.: Sulphur Dioxide. Notes on the Electronic Changes which Occur on Coordination . . . 254
Davis, R. E, Kim, K. S.: Fermi Resonance in the Carbonyl Band of Cyclopentanone . . . 89
Ecker, F., Hohlneicher, G.: Störungstheoretische Berechnung von Ionisierungsenergien und Elektronenaffinitäten mit Hilfe der Greenschen Zweipunktfunktion . . . 289
Elder, M., s. Dacre, P. D. . . . 254
Fraga, S., s. Lo, B. W. N. . . . 97, 391
Gamba, A., s. Cremaschi, P., et al. . . . 237
Gebelein, H., Jortner, J.: On the Relation between Non Adiabatic Unimolecular Reactions and Radiationless Processes . . . 143
Giessner-Prettre, C., Pullman, A.: Molecular Electrostatic Potentials: Comparison of *ab initio* and CNDO Results . . . 83
Goodisman, J.: Thomas-Fermi-Dirac Calculations for Molecules. II. One-Electron Energies for F_2 . . . 205
Gouterman, M., s. Schaffer, A. M. . . . 62
Güdel, H. U., Ballhausen, C. J.: Low Temperature Absorption Spectra of TcO_4^- and ReO_4^- in $KClO_4$ . . . 331
Hart, B. T., s. Brown, R. D., et al. . . . 49
Hinchliffe, A.: Further *ab initio* Calculations on the Allyl Radical . . . 138
Hohlneicher, G., s. Ecker, F. . . . 289
Hosoya, H.: Graphical Enumeration of the Coefficients of the Secular Polynomials of the Hückel Molecular Orbitals . . . 215
Hoyer, E., s. Reinhold, J. . . . 319
Hush, N. S., Williams, M. L.: Finite Electric Field Valence-Shell Calculations of Molecular Hyperpolarizabilities . . . 346

Jamieson, J., s. Armstrong, D. R., et al. . . . 396
Jortner, J., s. Gebelein, H. . . . 143
Jug, K., Lykos, P. G., McLean, A. D.: Exponent Optimization for Π States of H_2 10
— — — Optimal Double-Configuration Study of the Lowest Excited Π States of H_2. I. Potential Energy Curves and One-Electron Properties 17
— — — Optimal Double-Configuration Study of the Lowest Excited Π States of H_2. II. $\sigma - \pi$ Separation 41
Kankare, J. J.: Application of Coulson's Contour Integral Method to Linear Finite Polymers 189
Kaufmann, G., s. Choplin, F. . . . 54
Kim, K. S., s. Davis, R. E. . . . 89
King, R. B.: Chemical Applications of Topology and Group Theory. VI. Polyhydral Water Networks in Clathrates and Semiclathrates 309
Kleiner, M.: A Note on the Relation between CI and Rayleigh-Schrödinger Perturbation Theory 121
Klopman, G., Polak, R.: Semiempirical SCF Theory with "Scaled" Slater Orbitals. II. Molecular Calculations 223
Kventsel, G. F., s. Ukrainsky, I. I. . . . 360
Labarre, J.-F., s. Robinet, G., et al. . . . 259
Ladd, M. F. C.: Charge Distributions in Polyatomic Ions 400
Leibovici, C., s. Robinet, G., et al. . . . 259
Lo, B. W. N., Saxena, K. M. S., Fraga, S.: Complete Spin-Orbit Interaction in Many-Electron Atoms 97
— Fraga, S.: Nuclear Mass Effect in Many-Electron Atoms 391
Lykos, P. G., s. Jug, K., et al. . . . 10, 17, 41
McLaughlin, D. R., Bender, C. F., Schaefer, H. F., III: Geometry and Force Constant Determination from Correlated Wave Functions for Polyatomic Molecules: Ground States of H_2O and CH_2 352
Mc Lean, A. D., s. Jug, K., et al. . . . 10, 17, 41
Melrose, M. P., Briggs, P. J.: Integral Hellmann-Feynman Investigations of *trans* Bent Acetylene 181
Nelander, B.: A CNDO/2 Calculation on a Complex between Ethylene and Chlorine . . . 382
Paoloni, L., s. Cignitti, M. . . . 277
Perkins, P. G., s. Armstrong, D. R., et al. . . . 396
Polak, R., s. Klopman, G. . . . 223
Pullman, A., s. Giessner-Prettre, C. . . . 83
Reinhold, J., Hoyer, E.: Angenäherte Berechnung der Dreizentren-Kernanziehungsintegrale in LCAO—MO-Verfahren für Koordinationsverbindungen 319
Reinsch, E.-A.: Das Kastenmodell als Grundlage für ein *ab initio*-Verfahren. III. Ergebnisse für das Wasserstoff- und Heliumatom 338
Robinet, G., Crasnier, F., Labarre, J.-F., Leibovici, C.: Analyse conformationnelle théorique de la diméthylsulfone, $(CH_3)_2SO_2$ 259
Saxena, K. M. S., s. Lo, B. W. N., et al. . . . 97
Schaefer, H. F., s. McLaughlin, D. R., et al. . . . 352
Schaffer, A. M., Gouterman, M.: Porphyrins XXV. Extended Hückel Calculations on Location and Spectral Effects of Free Base Protons 62
Scrocco, E., s. Alagona, G., et al. . . . 103
Simonetta, M., s. Cremaschi, P., et al. . . . 237
Tapia, O., Bessis, G.: Intermolecular Interactions-Dependence on Inter- and Intra-Molecular Distances. A Configuration Interaction Study of the $H_2 \cdots H_2$ System . . 130
Tomasi, J., s. Alagona, G., et al. . . . 103
Ukrainsky, I. I., Kventsel, G. F.: Electronic Structure of Long Polyene Chains with an Impurity Atom 360
Walker, T. E. H.: On Open Shell Hartree-Fock Calculations 1
Williams, M. L., s. Hush, N. S. . . . 346
Wirsam, B.: *Ab initio* Untersuchungen über Stabilität und Spektren des hypothetischen Moleküls Si_2H_2 169

Recensio

Fackler, J. P., Jr.: Symmetry in Coordination Chemistry. (Ref. H.-H. Schmidtke) . . . 120

Theoretica Chimica Acta

It is a fundamental condition that manuscripts submitted should not have been published elsewhere, in this or any other country. The author must undertake not to publish elsewhere at a later date. With the acceptance of a manuscript for publication, the publishers acquire the sole copyright for all languages and countries. Unless special permission has been granted by the publishers, no photographic reproductions, microform or any other reproductions of a similar nature may be made of the journal, of individual contributions contained therein or of extracts therefrom.

The use in this journal of registered or trade names, trademarks etc. without special acknowledgement does not imply that such names, as defined, by the relevant protection laws, may be regarded as unprotected and thus free for general use.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, seinen Beitrag auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung, auch in Mikroform, an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,40 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

En principe, ne sont acceptés que des articles n'ayant jamais été publiés, ni dans leur pays d'origine, ni à l'étranger. L'auteur s'engage à ne pas remettre son manuscrit ailleurs après acceptation. Dès l'acceptation d'un manuscrit et sa publication par la maison d'édition, le droit d'impression pour toutes langues et tous pays, y compris le droit de reproduction photographique, en microforme ou par tout autre moyen, est acquis par la maison d'édition.

L'utilisation de marques déposées, marques de commerce, etc., dans ce journal, même sans indications particulière, n'implique pas que l'emploi de ces dénominations est exonéré des restrictions qu'imposent les lois régissant l'utilisation des marques déposées, etc.

THEORETICA CHIMICA ACTA

Vol. 25 Fasc. 4

Commentationes

King, R. B.: Chemical Applications of Topology and Group Theory. VI. Polyhdral Water Networks in Clathrates and Semiclathrates 309

Reinhold, J., Hoyer, E.: Angenäherte Berechnung der Dreizentren-Kernanziehungsintegrale in LCAO—MO-Verfahren für Koordinationsverbindungen 319

Approximation of Three-Center Nuclear Attraction Integrals in LCAO-MO-*Methods for Coordination Compounds*

Güdel, H. U., Ballhausen, C. J.: Low Temperature Absorption Spectra of TcO_4^- and ReO_4^- in $KClO_4$ 331

Reinsch, E.-A.: Das Kastenmodell als Grundlage für ein *ab initio*-Verfahren. III. Ergebnisse für das Wasserstoff- und Heliumatom 338

The Box Model as a Basis for an ab initio Procedure. III. Results for the Hydrogen and the Helium Atom

Hush, N. S., Williams, M. L.: Finite Electric Field Valence-Shell Calculations of Molecular Hyperpolarizabilities 346

McLaughlin, D. R., Bender, C. F., Schaefer, H. F., III: Geometry and Force Constant Determination from Correlated Wave Functions for Polyatomic Molecules: Ground States of H_2O and CH_2 352

Ukrainsky, I. I., Kventsel, G. F.: Electronic Structure of Long Polyene Chains with an Impurity Atom 360

Bertran, J.: Theoretical Study of the Photodimerization of Pyrimidine Bases 372

Nelander, B.: A CNDO/2 Calculation on a Complex between Ethylene and Chlorine. . . 382

Lo, B. W. N., Fraga, S.: Nuclear Mass Effect in Many-Electron Atoms 391

Relationes

Armstrong, D. R., Jamieson, J., Perkins, P. G.: The Electronic Structure of the Silyl Halides 396

Ladd, M. F. C.: Charge Distributions in Polyatomic Ions 400

Indexed in Current Contents

Responsible for advertisements: Edgar Seidler, D-1000 Berlin 15, Kurfürstendamm 237
Telephone (0311) 883 37 55, Telex: 01-82 811

Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York

Printed in Germany by Brühlsche Universitätsdruckerei, Gießen

© by Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1972